

## 华东师范大学 AI for Science 会议日程

2024 年 10 月 15 日，星期二 华东师范大学闵行校区数学楼 102	
8:40-9:00	开幕式
9:00-9:40	<b>Chair:</b> 羊丹平 (华东师范大学) <b>Speaker:</b> 龚禾林 (上海交通大学) <i>模型和数据融合的机器学习建模及在反应堆的数字孪生应用</i>
9:40-10:20	<b>Chair:</b> 龚禾林 (上海交通大学) <b>Speaker:</b> 倪国喜 (北京应用物理与计算数学研究所) <i>Deep learning accelerated numerical simulation for compressible fluids</i>
茶歇 (20 分钟)	
10:40-11:20	<b>Chair:</b> 倪国喜 (北京应用物理与计算数学研究所) <b>Speaker:</b> 张选泽 (中国科学院地理科学与资源研究所) <i>CAS-CANGLONG: A SKILLFUL 3D TRANSFORMER MODEL FOR SUB-SEASONAL TO SEASONAL GLOBAL SEA SURFACE TEMPERATURE PREDICTION</i>
11:20-12:00	<b>Chair:</b> 张选泽 (中国科学院地理科学与资源研究所) <b>Speaker:</b> 陈勇 (华东师范大学) <i>Lax pairs informed neural networks solving integrable systems.</i>

2024 年 10 月 15 日, 星期二 华东师范大学闵行校区数学楼 102

14:00-14:40	<b>Chair:</b> 许鹏博 (华东师范大学) <b>Speaker:</b> 闫亮 (东南大学) <i>基于深度学习的数值反演算法及应用</i>
14:40-15:20	<b>Chair:</b> 闫亮 (东南大学) <b>Speaker:</b> 陈洁 (西交利物浦大学) <i>Machine Learning-based Generalized Multiscale Finite Element Method and its Application in Reservoir Simulation</i>
茶歇 (20 分钟)	
15:40-16:20	<b>Chair:</b> 陈洁 (西交利物浦大学) <b>Speaker:</b> 肖敦辉 (同济大学) <i>基于物理与数据混合驱动神经网络的降阶模型的区域分解方法</i>
16:20-17:00	<b>Chair:</b> 肖敦辉 (同济大学) <b>Speaker:</b> 应时辉 (上海大学/上海市应用数学与力学研究所) <i>基于网络解构的医学影像计算</i>

## 模型和数据融合的机器学习建模及在反应堆的数字孪生应用

龚禾林

(上海交通大学)

随着计算机技术和数值求解技术的进步，基于多物理紧耦合的高精度、高分辨率、高置信度的高保真数值建模与模拟技术得到极大发展，在推动核反应堆内物理现象的精确数值呈现和分析、大幅度提高核反应堆的设计能力和安全运行能力、驱动核能技术的快速发展方面作用日益明显。即便如此，不确定分析和试验及运行数据均证实，因反应堆工程计算所需输入数据繁多，随着堆芯燃耗的加深，模型参数和输入数据的不确定性增加且缺乏机理描述，导致高保真数值模型在计算精度方面的提升空间依然受限。另一方面，随着核反应堆的运行，高品质测量数据类型和体量激增，基于模型和数据融合的机器学习建模与计算范式有望进一步促进计算精度的提升。本报告主要介绍模型和数据融合的机器学习建模及在反应堆的数字孪生应用的最新工作和未来计划。

龚禾林：索邦大学数学博士，上海交通大学巴黎卓越工程师学院副教授。长期致力工程科学计算与数字孪生的研究，特别是核能科学与工程中复杂工业系统数据挖掘、模型简化、数据同化、科学计算机器学习、核电站在线监测及预测性维护、数字孪生模型研究和系统研究等。主持国家自然科学基金青年基金 1 项、核动力技术创新中心基金 1 项、KGJ 稳定支持项目 1 项，主研国家自然科学基金面上项目 1 项。已发表专业论文 20 余篇（SCI 收录 15 篇），获得授权发明专利 9 项，获四川省科技进步二等奖 1 项（1/8），中国核能行业协会科技进步二等奖 1 项（9/15），中国专利优秀奖 1 项（5/11）。

## Deep learning accelerated numerical simulation for compressible fluids

倪国喜

(北京应用物理与计算数学研究所)

In this report, we propose a deep learning-based approach to accelerate the numerical computation and further improve the accuracy in simulating three-dimensional compressible fluids. The proposed work utilizes 3D Euler transformer networks to learn the interpolation coefficients for cell boundaries, which are applied to approximate the boundary fluxes of fluid on coarser grids. Benefiting from learning features of high-resolution fluid flow, our learned interpolation method yields finer performance on coarse grids, thereby accelerating the fluid simulations and improving the numerical accuracy. The numerical experiments confirm that the proposed method improves performance in inference of coarse-grained dynamics.

---

倪国喜，研究员，博士生导师，2001年7月获北京大学应用数学博士学位，偏微分方程及其应用专业，2001年7月至2003年6月，北京应用物理与计算数学研究所博士后，2001年7月至今，北京应用物理与计算数学研究所计算物理实验室工作，目前主要从事流体力学理论与数值方法研究，在网格生成，流体力学动力学数值方法及移动网格方法等方面开展了相关的研究工作，先后承担国防科技重点实验室基金、中国工程物理研究院科学发展基金、国家自然科学基金多项

**BCAS-CANGLONG: A SKILLFUL 3D TRANSFORMER MODEL FOR SUB-SEASONAL TO SEASONAL GLOBAL SEA SURFACE TEMPERATURE PREDICTION**

张选泽

(中国科学院地理科学与资源研究所)

张选泽，中国科学院地理科学与资源研究所副研究员。主要研究领域为陆地碳水循环与全球变化，包括陆地生态系统碳-水耦合过程与机理、全球碳循环与气候变化的互馈关系、蒸散发过程与机理、干旱过程与机理、极端气候和人类活动的影响机制等。担任 *Geophysical Research Letters* 等 10 余个学术期刊审稿人。2022 年，入选中国科学院青年创新促进会会员。主持国家自然科学基金青年基金项目、参与重点项目。在 *Nature Communications*、*Environmental Research Letters* 等国际知名期刊上发表多篇文章

**Lax pairs informed neural networks solving integrable systems**

陈勇

(华东师范大学)

we propose the Lax pairs informed neural networks (LPINNs) tailored for integrable systems with Lax pairs by designing novel network architectures and loss functions, comprising LPINN-v1 and LPINN-v2. The most noteworthy advantage of LPINN-v1 is that it can transform the solving of complex integrable systems into the solving of a simpler Lax pairs to simplify the study of integrable systems, and it not only efficiently solves data-driven localized wave solutions, but also obtains spectral parameters and corresponding spectral functions in Lax pairs. On the basis of LPINN-v1, we additionally incorporate the compatibility condition/zero curvature equation of Lax pairs in LPINN-v2, its major advantage is the ability to solve and explore high-accuracy data-driven localized wave solutions and associated spectral problems for all integrable systems with Lax pairs. The innovation of this work lies in the pioneering integration of Lax pairs informed of integrable systems into deep neural networks, thereby presenting a fresh methodology and pathway for investigating data-driven

---

localized wave solutions and spectral problems of Lax pairs.

陈勇，华东师范大学，博士生导师，计算机理论所所长。长期从事非线性数学物理，计算机代数及程序开发、可积深度学习的研究工作。提出了可积深度学习理论框架和一系列可以机械化实现非线性方程求解的方法，发展了李群理论，开发出一系列研究程序。已在 SCI 收录的国际学术期刊上发表 SCI 论文 300 余篇。主持和参加国家自然科学基金重点项目，973 项目，国家自然科学基金长江创新团队项目，面上项目。

### 基于深度学习的数值反演算法及应用

闫亮

(东南大学)

近年来，基于深度学习和微分方程（PDE）结合的科学机器学习（SciML）方法逐渐成为科学计算领域研究的热点，在科学探究和工程应用的诸多领域得到广泛应用。本报告中，我们在回顾深度学习求解偏微分方程反问题的几种常用框架的基础上，介绍我们在该领域所设计的几种方法，包括自适应算子学习、基于失效信息的 PINNs 方法以及针对反障碍散射所设计的 SRnet 框架等。

闫亮，现为东南大学数学学院计算数学系教授、博士生导师，中国工业与应用数学学会不确定性量化专业委员会常务委员。主要从事不确定性量化、贝叶斯建模与计算、科学机器学习以及偏微分方程反问题的研究。主持国家自然科学基金重大研究计划培育项目、面上项目等，主持完成国家自然科学基金青年项目和江苏省自然科学基金青年项目各一项。已经在 SISC、SIAM JUQ、Inverse Problems、JCP、CMAME 等国内外刊物上发表 40 余篇学术论文。

### Machine Learning-based Generalized Multiscale Finite Element Method and its Application in Reservoir Simulation

陈洁

(复旦大学)

In multiscale modeling of subsurface fluid flow in heterogeneous porous media, standard polynomial basis functions are replaced by multiscale basis functions, which are used to predict pressure distribution. To produce such functions in the mixed Generalized Multiscale Finite Element Method (GMsFEM), a number of Partial Differential Equations (PDEs) must be solved, leading to significant computational overhead. The main objective of the work presented in this talk was to investigate the efficiency of Deep Learning (DL) models in reconstructing the multiscale basis functions of the mixed GMsFEM. To achieve this, four standard models named SkiplessCNN models were first developed to predict four different multiscale basis



---

functions (Basis 2 to 5). These predictions were based on two distinct datasets (initial and extended) generated, with the permeability field being the sole input. Subsequently, focusing on the extended dataset, three distinct skip connection schemes (FirstSkip, MidSkip, and DualSkip) were incorporated into the SkiplessCNN architecture. Following this developed four models - SkiplessCNN, FirstSkipCNN, MidSkipCNN, and DualSkipCNN - were separately combined using linear regression and ridge regression within the framework of Deep Ensemble Learning (DEL). Furthermore, the reliability of the Dual-SkipCNN model was examined using Monte Carlo (MC) dropout. Ultimately, two Fourier Neural Operator (FNO) models, operating on infinite-dimensional spaces, were developed based on a new dataset for directly predicting pressure distribution. Based on the results, sufficient data for the validation and testing subsets could help decrease overfitting. Additionally, all three skip connections were found to be effective in enhancing the performance of SkiplessCNN, with DualSkip being the most effective among them. As evaluated on the testing subset, the combined models using linear regression and ridge regression meaningfully outperformed the individual models for all basis functions. The results also confirmed the robustness of MC dropout for DualSkipCNN in terms of epistemic uncertainty. Regarding the FNO models, it was discovered that the inclusion of an MLP in the original Fourier layers significantly improved the prediction performance on the testing subset. Looking at this work as an image (matrix)-to-image (matrix) problem, the developed data-driven models through various techniques could potentially find applications beyond reservoir engineering.

陈洁：副教授，博士生导师，分别于 2004 年和 2007 年在南京大学数学系获得学士和硕士学位，2011 年在南洋理工大学获得博士学位；于 2011/08-2012/10 在香港科技大学做博士后研究，于 2012/11-2013/03 在沙特国王大学做博士后研究；2013/04 进入西安交通大学数学与统计学院工作，2019/08 进入西交利物浦大学工作。研究方向包括有限元方法，计算流体力学，油藏模拟。在 *Mathematics of Computation*, *Journal of computational physics*, *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 等国际权威期刊上发表论文二十余篇，主持和参与面上项目、青年基金、博士后特等资助、CMG 基金、JS 大数据与小数据分析方法及应用等十余项科研项目。担任包括 *Journal of Computational Physics*, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, *Water Resources Research*, *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 在内 20 多个国际期刊的审稿人。担任教育部学位论文评审专家。2019 年，陈洁参加第 8 届华人数学家大会并做 45 分钟邀请报告。

### 基于物理与数据混合驱动神经网络的降阶模型的区域分解方法

肖敦辉

(同济大学)

This talk will present a novel domain decomposition (DD) for Physics-Data

---

Combined Neural Network (DD-PDCNN) based reduced order model (ROM). In this method, the computational domain is partitioned into a number of subdomains, and a Physics-Data Combined Neural Network (PDCNN) is constructed for each subdomain, which not only represents the dynamics within its region but also considers interactions with neighbouring subdomains. The interface conditions between subdomains are considered by averaging solutions at the neighbourhoods, incorporating averaged solutions, predicted solutions at current and next time levels into reduced governing equations. The implicit coupling among the subdomains ensures global continuity and establishes boundary conditions for each subdomain.

The performance of this new DD-PDCNN is compared with that of PDCNN without domain decomposition, data-driven model and traditional Reduced Basis (RB) model. The capability of this model is tested using a number of parametric nonlinear problems, such as the Kortewegde Vries (KdV) equation, the two-dimensional Kovasznay flow and the two-dimensional incompressible Navier–Stokes equation.

This talk will also cover basic knowledge of AI driven reduced order modelling (ROM), physics-data combined machine learning based ROM and other topics in the ROM community.

肖敦辉，同济大学数学科学学院教授，国家高层次海外青年人才以及上海市高层次海外领军人才入选者，中国数学会计算数学分会第十一届常务理事，张江数学研究院同济分院副院长。2016 年获帝国理工流体力学博士学位，曾先后就职于英国帝国理工地球科学系和数据科学所，斯旺西大学辛克维奇工程计算中心。主持英国基金委如 EPSRC, Royal Society 和中国国家级项目多项，发表 SCI 论文 40 多篇。研究领域包括低阶计算模型、模型降阶、数据驱动模型、计算力学、物理与数据混合驱动计算模型、数据科学、计算流体力学和人工智能。

### 基于网络解构的医学影像计算

应时辉

(上海大学/上海市应用数学与力学研究所)

近年来，基于深度学习的人工智能领域发展迅猛，但对于模型的可解释性仍然是一个富有挑战的问题，制约着人工智能的进一步发展。本报告围绕深度学习模型的可解释性展开，特别地，从 AI4Optimization 视角对网络进行解构，部分实现网络的可解释性。具体地，针对跨模态医学影像的快速重建和面向肺部滑移运动的影像配准两个实际任务出发，通过模型松弛，将相关物理模型分解为多个可网络化的子问题，通过网络串联实现交替迭代优化过程。最后，实现求解两个任务的优化算法网络化，并在多个数据集上的实验验证所提网络的部分可解释性和有效性。

应时辉，博士，上海大学教授、博士生导师。分别于 2001 年和 2008 年在西安交通大学获得学士和博士学位，2012-2013 在美国北卡罗来纳大学教堂山分校从事博士后研究。主要从事流形上的反问题、医学影像处理与智能分析等方面

---

的研究工作。针对流形上的反问题，建立基于流形约束优化和保结构算法的统一数学分析框架，形成医学影像配准与标准化问题表征的新理论与新方法，建立了目前最为精准的大脑图谱。近年来，在包括 Nature Communications、IEEE T-PAMI 等 IEEE 汇刊和 JCP、NeuroImage、Pattern Recognition 等顶刊以及 CVPR、IJCAI 等顶会上发表学术论文 100 余篇（包括多篇 ESI 高被引和热点论文）。研究成果被引 2400 余次、单篇最高被引 400 余次。目前在研主持国家重点研发计划数学与应用专项课题、国家自然科学基金面上项目各 1 项，主持完成国家级项目和省部级重点项目 3 项。受邀担任中国工业与应用数学学会数学与医学交叉学科专委会委员、中国运筹学会医疗运作管理分会理事、上海生物医学工程学会人工智能专委会常务委员，以及多个 SCI 期刊客座主编/编辑和著名国际会议程序委员会高级委员/委员。

















